

日 本 国 特 許 庁  
JAPAN PATENT OFFICE

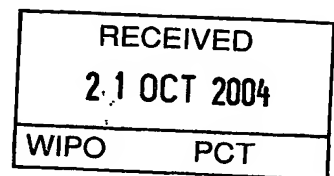
29. 9. 2004

別紙添付の書類に記載されている事項は下記の出願書類に記載されている事項と同一であることを証明する。

This is to certify that the annexed is a true copy of the following application as filed with this Office.

出 願 年 月 日                      2 0 0 3 年    9 月 2 2 日  
Date of Application:

出 願 番 号                      特 願 2 0 0 3 - 3 3 0 2 9 0  
Application Number:  
[ST. 10/C]:                      [ J P 2 0 0 3 - 3 3 0 2 9 0 ]



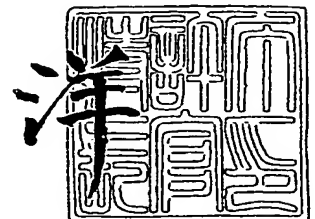
出 願 人                      日本電気株式会社  
Applicant(s):                      NECソフト株式会社

PRIORITY DOCUMENT  
SUBMITTED OR TRANSMITTED IN  
COMPLIANCE WITH  
RULE 17.1(a) OR (b)

2 0 0 4 年    7 月 2 1 日

特許庁長官  
Commissioner,  
Japan Patent Office

小 川



【書類名】 特許願  
【整理番号】 34103820  
【提出日】 平成15年 9月22日  
【あて先】 特許庁長官 殿  
【国際特許分類】 G06F 17/60  
【発明者】  
    【住所又は居所】 東京都港区芝五丁目 7 番 1 号 日本電気株式会社内  
    【氏名】 高田 俊和  
【発明者】  
    【住所又は居所】 東京都江東区新木場一丁目 1 8 番 6 号 NECソフト株式会社内  
    【氏名】 山本 純一  
【発明者】  
    【住所又は居所】 東京都江東区新木場一丁目 1 8 番 6 号 NECソフト株式会社内  
    【氏名】 中田 一人  
【特許出願人】  
    【識別番号】 000004237  
    【氏名又は名称】 日本電気株式会社  
【特許出願人】  
    【識別番号】 000232092  
    【氏名又は名称】 NECソフト株式会社  
【代理人】  
    【識別番号】 100123788  
    【弁理士】  
    【氏名又は名称】 宮崎 昭夫  
    【電話番号】 03-3585-1882  
【選任した代理人】  
    【識別番号】 100088328  
    【弁理士】  
    【氏名又は名称】 金田 暢之  
【選任した代理人】  
    【識別番号】 100106297  
    【弁理士】  
    【氏名又は名称】 伊藤 克博  
【選任した代理人】  
    【識別番号】 100106138  
    【弁理士】  
    【氏名又は名称】 石橋 政幸  
【手数料の表示】  
    【予納台帳番号】 201087  
    【納付金額】 21,000円  
【提出物件の目録】  
    【物件名】 特許請求の範囲 1  
    【物件名】 明細書 1  
    【物件名】 図面 1  
    【物件名】 要約書 1  
    【包括委任状番号】 0304683  
    【包括委任状番号】 0304621

## 【書類名】特許請求の範囲

## 【請求項 1】

分子軌道法におけるハートリー・フォック法の計算を実行するための並列計算方法であって、

複数の計算機からなる計算機クラスタを使用し、

密度行列を複数の部分密度行列に分割して該複数の部分密度行列を前記複数の計算機上に分散して格納し、

前記複数の部分密度行列を前記複数の計算機間で順番に転送させながら、前記各計算機において前記部分密度行列に対する演算処理を実行する、

並列計算方法。

## 【請求項 2】

前記各計算機において部分的に 2 電子積分を行い、該 2 電子積分の結果に基づいて、格納している部分密度行列を更新する、請求項 1 に記載の並列計算方法。

## 【請求項 3】

前記密度行列を複製を用い、前記密度行列及び前記複製をそれぞれ部分密度行列に分割して前記各計算機間で転送させることにより、積分計算を減らす、請求項 1 または 2 に記載の並列計算方法。

## 【請求項 4】

前記密度行列と前記密度行列の複製とを計 4 個使用し、前記密度行列及び前記複製をそれぞれ部分密度行列に分割して前記各計算機間で転送させ、さらに、2 電子積分における  $(rs|tu) \leftrightarrow (tu|rs)$  の対称性を使うことにより、積分計算を減らす、請求項 1 または 2 に記載の並列計算方法。

## 【請求項 5】

分子軌道法におけるハートリー・フォック法の計算を実行するための並列計算装置であって

複数の計算機を備える計算機クラスタを有し、

前記各計算機は、密度行列を分割した部分密度行列を格納する行列格納部と、前記計算機クラスタ中の他の計算機に対して前記部分密度行列を送受信する転送制御部と、前記行列格納部に格納された部分密度行列に関する演算を実行する演算処理部と、を有し、

前記複数の部分密度行列を前記複数の計算機間で順番に転送させながら、前記各計算機において前記部分密度行列に対する演算処理を実行する、並列計算装置。

## 【請求項 6】

前記演算処理部は部分的に 2 電子積分を行い、該 2 電子積分の結果に基づいて前記行列格納部内の部分密度行列が更新される、請求項 5 に記載の並列計算装置。

## 【請求項 7】

前記密度行列及び前記密度行列の複製をそれぞれ部分密度行列に分割して前記各計算機間で転送させることにより、積分計算を減らす、請求項 5 または 6 に記載の並列計算装置。

## 【請求項 8】

前記密度行列と前記密度行列の複製との計 4 個をそれぞれ部分密度行列に分割して前記各計算機間で転送させ、さらに、2 電子積分における  $(rs|tu) \leftrightarrow (tu|rs)$  の対称性を使うことにより、積分計算を減らす、請求項 5 または 6 に記載の並列計算装置。

## 【請求項 9】

複数のノードから構成される計算機クラスタにおける各ノードの計算機を、

密度行列を分割した部分密度行列を格納する行列格納部、前記計算機クラスタの他のノードに対して前記部分密度行列を送受信する転送制御部、前記行列格納部に格納された部分密度行列に関する演算を実行する演算処理部、として機能させ、

それによって、前記複数の部分密度行列が前記複数のノード間で順番に転送されながら、前記各ノードにおいて前記部分密度行列に対する演算処理が実行されるようにする、プ

プログラム。

【請求項 10】

計算機が読み取り可能な記録媒体であって、請求項 9 に記載のプログラムを格納した記録媒体。

【書類名】明細書

【発明の名称】並列計算方法及び装置

【技術分野】

【0001】

本発明は、分子シミュレーションなどに適した並列計算方法及び装置に関し、特に、RHF（制限ハートリー・フォック；Restricted Hartree-Fock）法による分子軌道計算に適合した並列計算方法及び装置に関する。

【背景技術】

【0002】

量子化学理論の発展や計算機技術の進歩によって、計算により、分子の構造、物性や、分子内の化学結合や分子軌道、電子状態などを精度よくシミュレーションできるようになってきた。そのような手法は一般に分子軌道法と呼ばれる。分子軌道法の中でも、経験的パラメータに原則として依存しない非経験的分子軌道法は、近似計算であるにせよシュレーディンガー方程式を解くために莫大な計算量を必要とするため、これまでは、小さな分子にしか適用することができなかった。しかしながら、近年のコンピュータの性能の著しい向上により、生体関連物質を含む比較的大きな分子に対しても非経験的分子軌道法計算を実行できるようになり、例えば、生理活性を有する物質の解析や探索に使用されるようになってきている。

【0003】

非経験的分子軌道法にはいくつかの手法があるが、分子の全エネルギーを得るために最も使用される方法として、ハートリー・フォック（HF）法がある。HF法は、シュレーディンガー方程式に対して1電子近似、線形近似を行なったロータン方程式

【0004】

【数1】

$$FC = SC\epsilon \quad (1)$$

【0005】

を解く方法として定式化されている。ここで、解析対象である分子における原子軌道（AO；Atomic Orbital）の数をN、分子軌道（MO；Molecular Orbital）の数をMとすると、F、Sは、いずれもN×N行列、CはM×N行列、 $\epsilon$ はM次元ベクトルである。Fはフォック行列と呼ばれ、

【0006】

【数2】

$$F_{rs} = H_{rs} + \sum_{t,u=1}^N D_{tu} \left[ (rs|tu) - \frac{1}{2}(rt|su) \right] \quad (2)$$

【0007】

で与えられる。Dは密度行列と呼ばれ、次のようにMO係数Cによって定義されている。

【0008】

【数3】

$$D_{tu} = 2 \sum_{j=1}^{\text{occ}} C_{tj} C_{uj} \quad (3)$$

【0009】

ここで、記号 $\sum$ でのoccは、電子が占有する分子軌道についての和であることを表している。S、H、 $(rs|tu)$ は、各々、重なり積分、Hコア積分、2電子積分と呼ばれる物理量であり、原子軌道 $\phi_r$ を用いて、

【0010】

【数 4】

$$S_{rs} = \int_{-\infty}^{\infty} \phi_r^* \phi_s d^3x \quad (4)$$

$$H_{rs} = \int_{-\infty}^{\infty} \phi_r^* \left[ -\frac{1}{2} \nabla^2 - \sum_i^{\text{core}} \frac{Z_i}{|r - R_i|} \right] \phi_s d^3x \quad (5)$$

$$(rs|tu) = \int_{-\infty}^{\infty} \phi_r^*(1) \phi_s(1) \frac{1}{r_{12}} \phi_t^*(2) \phi_u(2) d^3x \quad (6)$$

【0 0 1 1】

と表される。ここで、coreは、原子核について和であることを表す。ところで式(1)は、線型方程式の型に書かれてはいるが、フォック行列Fが原子軌道 $\phi_i$ に依存して決まるため、実際には非線形方程式であって、完全に解くことはできない。そこで、この方程式を解くのに用いられるのが、自己無撞着場の方法 (S C F (Self-consistent field)法) である。

【0 0 1 2】

S C F法では、よく知られているように、

- (1) MO係数Cの初期推測値を求める；
- (2) 密度行列DをMO係数Cから求める；
- (3) 得られた密度行列Dを使い、フォック行列Fを求める；
- (4) フォック行列Fを対角化し、固有値 $\epsilon$ と固有ベクトルを求める；
- (5) 得られた固有ベクトルから、新しいMO係数Cと密度行列Dを求める；
- (6) 密度行列Dが変化しなくなるまで、(3) から (5) までをくり返す；

という手順で計算が行われる。

【0 0 1 3】

S C F法の計算において、その費やす時間の大部分は(3)のフォック行列Fの計算である。その理由は、2電子積分 $(rs|tu)$ の計算を $N^4$ 回繰り返すからである。一度計算した2電子積分の結果をディスクなどのストレージ装置に保存しておく方法も考えられるが、大規模計算、例えばNが数万程度の場合であると、必要なディスク容量が膨大になってしまうため、多くの場合は2電子積分を毎回計算するダイレクト方式が取られる。したがって、フォック行列Fの計算を高速化することが、S C F法計算全体の高速化に直結する。

【0 0 1 4】

この分子軌道法計算を高速に実行する方法として、例えば、特許文献1 (特開2 0 0 0 - 2 9 3 4 9 4)、特許文献2 (特開2 0 0 1 - 3 1 2 4 8 5) 及び特許文献3 (特開平9 - 5 0 4 2 8) に開示された方法がある。これらの方法は、1台のベクトル計算機などのホスト機で行列計算などを行ない、その一方で、フォック行列Fの計算又は2電子積分の計算を並列計算機や計算機クラスタに行なわせる方法である。しかしこの方法では、対角化などの行列計算をいわゆるホスト機で行なうため、ホスト機のメモリ容量を超える大きさの行列を扱うことはできない、という問題点がある。これに対してはホスト機を複数台並列に用意するなどの対処法は存在するが、この対処法は高価なため容易に行なうことはできない。近年は、汎用計算機の低価格化や性能向上もあり、計算機クラスタで高速で廉価なシステムを作れるようになった。汎用計算機クラスタでは、計算機1台あたりのメモリ容量は高性能計算機に比べ小容量であるが、接続する計算機の台数を増やせばシステム全体の容量は大容量になる。また、接続する計算機の台数を増やすことは、高速化にもつながる。ただし、汎用計算機クラスタでは、計算機1台ごとのメモリ容量は小さいため、大型分子の行列計算を1台の計算機で行なうことはできず、分子軌道数が数万軌道になると、1つの行列をメモリ上に確保することもできない、という問題点がある。

【特許文献1】特開2 0 0 0 - 2 9 3 4 9 4

【特許文献2】特開2001-312485

【特許文献3】特開平9-050428

【発明の開示】

【発明が解決しようとする課題】

【0015】

上述したように、計算機クラスタのような並列計算機システムを用いたとしても、大規模かつ高速な分子軌道計算を行うためには解決すべき多くの課題が残されている。大規模かつ高速な分子軌道計算を実現するために必要なのは、第1に、全ての行列要素を常に分散してメモリ領域に保存し、行列計算の際にも1台の計算機上に集めない計算方法の確立である。これにより、計算規模はシステム全体の総メモリ容量のみに依存し、計算機1台のメモリ容量には依存しなくなり、また高価なホスト機を用意する必要もなくなる。すなわち、大規模計算を行なうためには、接続される廉価な計算機の個数を多くすればよい。第2に、上記の方法において、計算量を削減する方法の確立である。1台の計算機上で計算する場合には計算量を1/16にする方法が知られているが、上記のように全ての行列要素を分散してメモリ領域に保存した場合の計算量を削減する方法は知られていない。並列台数を増やせば高速化できるが、計算量を削減できればさらなる高速化につながるので重要である。

【0016】

そこで本発明の目的は、密度行列を分割しても、アルゴリズムの工夫によって計算を高速に行えるようにでき、さらに、大規模計算を可能にし、従来計算できずにいた生体高分子などの分子軌道計算を行うことができる並列計算方法を提供することにある。

【0017】

本発明の別の目的は、密度行列を分割しても、アルゴリズムの工夫によって計算を高速に行えるようにでき、さらに、大規模計算を可能にし、従来計算できずにいた生体高分子などの分子軌道計算を行うことができる並列計算装置を提供することにある。

【課題を解決するための手段】

【0018】

本発明の並列計算方法は、分子軌道法におけるハートリー・フォック法の計算を実行するための並列計算方法であって、複数の計算機からなる計算機クラスタを使用し、密度行列を複数の部分密度行列に分割して複数の部分密度行列を複数の計算機上に分散して格納し、複数の部分密度行列を複数の計算機間で順番に転送させながら、各計算機において部分密度行列に対する演算処理を実行する。

【0019】

この並列計算方法は、上述したRHF法の計算に適したものである。本発明によれば、密度行列を複数の計算機上に分散して保存した場合でもRHF法の計算が可能となり、計算時間を短縮することができる。本発明では、密度行列の複製を用いて積分計算を半数に減らし、計算時間を短縮するようにしてもよい。また、密度行列とその複製を計4個用意し、2電子積分における $(rs|tu) \Leftrightarrow (tu|rs)$ の対称性を使うことで、さらに計算時間を短縮するようにしてもよい。

【0020】

本発明の並列計算装置は、分子軌道法におけるハートリー・フォック法の計算を実行するための並列計算装置であって、複数の計算機を備える計算機クラスタを有し、各計算機は、密度行列を分割した部分密度行列を格納する行列格納部と、計算機クラスタ中の他の計算機に対して部分密度行列を送受信する転送制御部と、行列格納部に格納された部分密度行列に関する演算を実行する演算処理部と、を有し、複数の部分密度行列を複数の計算機間で順番に転送させながら、各計算機において前記部分密度行列に対する演算処理を実行する。

【発明の効果】

【0021】

本発明は、密度行列を分割したハートリー・フォック法の計算方法であり、分割された

部分密度行列を順次転送することによりフォック行列の生成を可能にし、作業領域を増やし異なる転送順序を組み合わせるにより計算量を減らし、転送方法を一回跳ばすことにより転送量を削減したものである。したがって、計算規模がシステム全体のメモリ容量にのみ依存する方法であるので、多数のコンピュータを並列接続することで大規模計算を可能にするとともに、計算時間を短縮することを可能にする。

【発明を実施するための最良の形態】

#### 【0022】

次に、本発明の好ましい実施の形態について、図面を参照して説明する。図1は、本発明の並列計算方法の実施に用いられる計算機システムを示している。

#### 【0023】

本実施形態では、図1に示すような計算機クラスタすなわち分散メモリ型並列計算機を想定している。すなわちこの計算機システムは、同様の性能を持った複数台の計算機を、通信機器によって接続したものである。従来の分子軌道計算アルゴリズムでは、大容量のメモリを必要とするため、ホスト計算機としていわゆるスーパーコンピュータなどの高性能計算機を用意することが多い。そして、高性能計算機は一般に高価であるため、費用面の問題となる場合がある。ところが本発明の方法を用いれば、そのようなホスト計算機を必要としないため、費用を軽減できる。

#### 【0024】

図1に示した例では、計算機システムは、複数台（ここでは $n$ 台）の計算機 $1_1 \sim 1_n$ と、これら計算機 $1_1 \sim 1_n$ が接続するハブ2とを備えた計算機クラスタである。計算機 $1_1 \sim 1_n$ としては、典型的には、パーソナルコンピュータ（PC）が使用されるので、この計算機クラスタは、PCクラスタということになる。ここでは1台のハブ2を用いて複数の計算機を接続しているが、各計算機を接続する形態はこれに限定されるものではなく、例えば、リング型あるいはバス型のネットワークに接続するようなものであってもよい。

#### 【0025】

図2は、上述した計算クラスタを構成する各計算機における論理的な機能を示したブロック図である。

#### 【0026】

本実施形態では、フォック行列の算出に必要な密度行列などの各行列を部分行列に分割して各ノード（計算機クラスタを構成する各計算機）に分割し、各ノードすなわち計算機ではその格納している部分行列に対してあるいはその部分行列に基づいて演算を行うとともに、ノード間でそのような部分行列を転送し、このような演算と転送とを繰り返すことによって、最終的な結果（例えばフォック行列）を得るようにしている。このように各計算機が機能するために、各計算機（ノード）は、図2に示すように、部分行列を格納する行列格納部11と、行列格納部11に格納されている部分行列を別のノードに転送し、別のノードから部分行列を受け取るための転送制御部12と、例えば2電子積分などの演算を行って行列格納部11内の部分行列に関する演算処理を実行する演算処理部13と、演算と転送との繰り返しの制御を行う制御部14と、が設けられている。

#### 【0027】

次に、本実施形態におけるこのような並列計算装置を用いた、密度行列 $D$ を分割した場合のフォック行列生成アルゴリズムの手順について、図3を用いて説明する。本実施形態の方法では、密度行列を複数の部分密度行列に分割し、それをノード間で転送しつつ2電子積分を繰り返し、最後にHコア行列との和を足し合わせるによって、フォック行列を生成する。図3では、複数のノード間での部分密度行列の転送を説明するために、PC1とPC2の2つのノードでの処理が並列して示されている。

#### 【0028】

まず、カウンタ $n$ を用意してその初期値を $n=0$ とする（ステップ101）。次に、ステップ102において、 $n$ に1を加算し、ステップ103において、2電子積分を部分的に計算し、計算した2電子積分値を用い、上述の(2)式の計算を行う。そして、ステップ104において、次に必要な部分密度行列を得るために、密度行列の転送を行う



。ここでノードPC1からノードPC2に部分密度行列が転送される。ノードPC1には別のノードから部分密度行列が送られて来るので、ノードPC1は、ノードPC2に転送した部分密度行列の代わりに、その送られてきた部分行列を行列格納部内に格納する。またノードPC2は、格納していた部分密度行列をさらに別のノードに転送する。

#### 【0029】

そして、ステップ105において、カウンタnが、ノード数（計算機数）に満たないかどうかを判定する。n<ノード数の場合には、ステップ102～104の処理を繰り返すためにステップ102に戻り、カウンタnを1だけインクリメントして再び2電子積分を行う。このとき行う計算では、転送されてきた部分密度行列に合わせ、前回とは異なる部分を計算させる。一方、ステップ105においてカウンタnがノード数と等しくなるかまたは超えたときは、全ノードで全ての部分密度行列に対して計算が行われたことになるので、ステップ106において、Hコア行列等を足し合わせ、計算を終了する。

#### 【0030】

本発明の並列計算方法は上述したものに限定されるものではない。転送される部分行列や転送の態様を選択することによって、以下に説明するように、各種の実施形態で本発明を実施することができる。以下の説明では、説明の簡単のために、ノード数が4であり、また、行列を部分行列に分割する際の分割数が4であるとする。

#### 【0031】

##### 〈例1：巡回密度行列法〉

まず、巡回密度行列法と呼ぶ実施形態について説明する。再びフォック行列Fを(7)式のように表す。

#### 【0032】

##### 【数5】

$$F_{rs} = H_{rs} + \sum_{t,u=1}^N D_{tu} \left[ (rs|tu) - \frac{1}{2}(rt|su) \right] \quad (7)$$

#### 【0033】

(7)式において、行列を表しているのは、 $F_{rs}$ ,  $H_{rs}$ ,  $D_{tu}$  ( $r, s, t, u=1, \dots, N$ ) である。行列の分割数4より、 $r, s, t, u$ は各々2つの領域、

#### 【0034】

##### 【数6】

$$R1, S1, T1, U1 = 1, \dots, N/2, \quad R2, S2, T2, U2 = N/2 + 1, \dots, N, \quad (8)$$

#### 【0035】

に分割すると、行列は4つに分割される。これにより、分割された部分行列を次のように呼ぶことにする。

#### 【0036】

##### 【数7】

$$\left. \begin{array}{lll} F(11) = F_{R1S1} & H(11) = H_{R1S1} & D(aa) = D_{T1U1} \\ F(21) = F_{R2S1} & H(21) = H_{R2S1} & D(ba) = D_{T2U1} \\ F(12) = F_{R1S2} & H(12) = H_{R1S2} & D(ab) = D_{T1U2} \\ F(22) = F_{R2S2} & H(22) = H_{R2S2} & D(bb) = D_{T2U2} \end{array} \right\} \quad (9)$$

#### 【0037】

また、これをまとめて表す場合には、

#### 【0038】

【数 8】

$$\left. \begin{aligned} F(RS) &= \{F(11), F(21), F(12), F(22)\} \\ H(RS) &= \{H(11), H(21), H(12), H(22)\} \\ D(TU) &= \{D(aa), D(ba), D(ab), D(bb)\} \end{aligned} \right\} (10)$$

【0039】

と表すことにする。この部分行列を、4つのノード（計算機）に分配する。ノード名を P11, P21, P12, P22 として、部分行列が各ノードに

【0040】

【数 9】

$$\left. \begin{aligned} P11 &: F(11), H(11), D(aa) \\ P21 &: F(21), H(21), D(ba) \\ P12 &: F(12), H(12), D(ab) \\ P22 &: F(22), H(22), D(bb) \end{aligned} \right\} (11)$$

【0041】

と分配されたとする。このように行列が分配された状態を初期分配状態（S-0）と呼ぶことにする。さて、(7)式における t, u についての和は、全領域について計算しなければならないが、各ノードには密度行列 D の一部が保持されているだけなので、このままでは計算できない。そこで、密度行列 D を転送し、その都度、(7)式の一部を計算していくことにする。この方法がうまく行くための条件は、各ノードが常に行列 D の各々異なる部分行列を持つことである。そのような方法のひとつとして、巡回的に部分行列を転送する方法がある。これは(7)式を次のように計算することである。

【0042】

【数 10】

$$\begin{aligned} P11 &: F(11) = H(11) + D(aa)G(11aa) + D(bb)G(11bb) + D(ab)G(11ab) + D(ba)G(11ba) \\ P21 &: F(21) = H(21) + D(ba)G(21ba) + D(aa)G(21aa) + D(bb)G(21bb) + D(ab)G(21ab) \\ P12 &: F(12) = H(12) + D(ab)G(12ab) + D(ba)G(12ab) + D(aa)G(12aa) + D(bb)G(12bb) \\ P22 &: F(22) = H(22) + D(bb)G(22bb) + D(ab)G(22ab) + D(ba)G(22ba) + D(aa)G(22aa) \\ &\dots (12) \end{aligned}$$

$$G(RSTU) = (RS|TU) - \frac{1}{2}(RU|TS) \quad (13)$$

$$R = \{R1, R2\}, \quad S = \{S1, S2\}, \quad T = \{T1, T2\}, \quad U = \{U1, U2\}, \quad (14)$$

【0043】

ここで、1, 2 は R, S の部分領域を表し、a, b は T, U の部分領域を表すので、それらの領域全てについて和を取ることにし、和の記号は省略した。(12)式は、それぞれノード P11 ~ P22 上での計算を表しており、初期分配状態（S-0）では第2項まで計算できる。第3項以降は、密度行列 D を転送した後でなければ計算できない。そこで、密度行列 D にのみ注目すると、その転送順序は図5のようになっていることが分かる。ここで、図の（S-0）～（S-3）は転送によって変化した分配状態の名前である。部分行列 D(aa) に注目すれば、P11, P21, P12, P22 の順に巡回することが分かる。逆に、ノード P21 に注目すると、D(ba), D(aa), D(bb), D(ab) の順に部分密度行列が巡って来ることが分かる。すなわち、全ての部分密度行列がノード P21 に順次転送されてきたことになる。全ノードについて同様なので、結局、(7)式を計算するには、この順序に部分密度行列を転送すればよいことになる。この転送を実現するには、ノードの名前を次のように読みかえると便利である。

【0044】

## 【数 1 1】

$$P(1) = P11, \quad P(2) = P21, \quad P(3) = P12, \quad P(4) = P22 \quad (15)$$

## 【0 0 4 5】

このようにすると、次のようなアルゴリズムによって、上記の転送による計算は実現できる。

## 【0 0 4 6】

- (1) F の一部分を計算する；
- (2) ノード  $P(i)$  は、自らが格納している部分密度行列を  $P(i+1)$  へ送信する；
- (3) ノード  $P(i)$  は、 $P(i-1)$  が格納していた部分密度行列を受け取る；
- (4) (1) ~ (3) をノードの数だけ繰り返す。

## 【0 0 4 7】

ただし、4 ノードで考えているので、ノード番号  $i$  には周期的境界条件  $i = i + 4$  を課す。図 5 のように、ノード数回（ここでは 4 回）転送を行うと、部分密度行列が一周し、計算の初期分配状態 ( $S = 0$ ) に戻り、計算が終了する。

## 【0 0 4 8】

## 《例 2. 二重巡回密度行列法》

次に、二重巡回密度行列法と呼ぶ形態について説明する。ここでは、密度行列  $D$  の複製を用いることにより、積分計算を半数に減らし、計算時間を短縮するようにしている。ここでの記号は、上述した巡回密度行列法と同様のものを使用する。この方法では、(7) 式を次のように分解する。

## 【0 0 4 9】

## 【数 1 2】

$$\left. \begin{aligned} F_{rs} &= H_{rs} + J_{rs} - \frac{1}{2} K_{rs} \\ J_{rs} &= \sum_{t=1}^N \sum_{u=1}^N D_{tu}(rs|tu) \\ K_{ru} &= \sum_{t=1}^N \sum_{s=1}^N D_{ts}(rs|tu) \end{aligned} \right\} \quad (16)$$

## 【0 0 5 0】

$J$ ,  $K$  は各々クーロン積分と交換積分の和を示す行列である。これを、巡回密度行列法と同様に領域とノードごとの計算に書き直す。

## 【0 0 5 1】

## 【数 1 3】

$$\left. \begin{aligned} P11 &: F(11) = H(11) + J(11) - K(11)/2 \\ P21 &: F(21) = H(21) + J(21) - K(21)/2 \\ P12 &: F(12) = H(12) + J(12) - K(12)/2 \\ P22 &: F(22) = H(22) + J(22) - K(22)/2 \end{aligned} \right\} \quad (17)$$

$$\begin{aligned} P11 &: J(11) = D(aa)(11|aa), & J(11) &= D(bb)(11|bb), & J(11) &= D(ab)(11|ab), & J(11) &= D(ba)(11|ba) \\ P21 &: J(21) = D(ba)(21|ba), & J(21) &= D(aa)(21|aa), & J(21) &= D(bb)(21|bb), & J(21) &= D(ab)(21|ab) \\ P12 &: J(12) = D(ab)(12|ab), & J(12) &= D(ba)(12|ba), & J(12) &= D(aa)(12|aa), & J(12) &= D(bb)(12|bb) \\ P22 &: J(22) = D(bb)(22|bb), & J(22) &= D(ab)(22|ab), & J(22) &= D(ba)(22|ba), & J(22) &= D(aa)(22|aa) \\ P11 &: K(1a) = D(a1)(11|aa), & K(1b) &= D(b1)(11|bb), & K(1b) &= D(a1)(11|ab), & K(1a) &= D(b1)(11|ba) \\ P21 &: K(2a) = D(b1)(21|ba), & K(2a) &= D(a1)(21|aa), & K(2b) &= D(b1)(21|bb), & K(2b) &= D(a1)(21|ab) \\ P12 &: K(1b) = D(a2)(12|ab), & K(1a) &= D(b2)(12|ba), & K(1a) &= D(a2)(12|aa), & K(1b) &= D(b2)(12|bb) \\ P22 &: K(2b) = D(b2)(22|bb), & K(2b) &= D(a2)(22|ab), & K(2a) &= D(b2)(22|ba), & K(2a) &= D(a2)(22|aa) \\ & & & & & & \dots (18) \end{aligned}$$

## 【0 0 5 2】

ここでは、各ノードで計算される2電子積分 ( $r s | t u$ ) が、J, Kの分配状態ごとに等しくなるように並べられている。言い換えると、2電子積分 ( $r s | t u$ ) を一回計算するだけでよいように並べてある。そのために、Kの部分行列も転送しなければならない。行列J (RS), D(TU), K(RU), D(TS)の転送は、それぞれ、図4～図7に示すようになる。K(RU) (R, S, T, Uは領域) の転送は、一見複雑に見えるが、図8のように書き直すと分かりやすい。すなわち、K(RU)については、P11とP12、P21とP22の間でのみ転送がおき、一方D(TS)は、図7より、P11とP21、P12とP22の間でのみ転送がおこる。これは、ノードを次のように読みかえることで分かりやすくなる。

【0053】

【数14】

$$P(1,1) = P11, \quad P(2,1) = P21, \quad P(1,2) = P12, \quad P(2,2) = P22 \quad (19)$$

【0054】

このようにしたとき、

(1) K(RU)の転送は、 $P(i, j)$ , ( $i, j = \{1, 2\}$ ) の  $i$  が等しいノードとの間でのみ行われ、また、

(2) D(TS)の転送は、 $P(i, j)$ , ( $i, j = \{1, 2\}$ ) の  $j$  が等しいノードとの間でのみ行われる。

【0055】

K(RU)は、転送される場合と転送されない場合とが存在するが、これは分配状態 ( $S - n$ ) の状態番号  $n$  ( $= 0, 1, 2, \dots$ ) と巡回周期  $t$  ( $= 1, 2, 3, \dots$ ) で判定できる。まず、巡回周期  $t$  は、ノード数を  $m$  として、

【0056】

【数15】

$$t = m / j_{\max} \quad (20)$$

【0057】

で求められる。これを用いることにより、K(RU)の転送が起きる条件は具体的には次のようになる。

【0058】

【数16】

$$i = (n \bmod t) + 1 \quad (21)$$

【0059】

これが成り立つノード  $P(i, j)$  でのみ、次回に転送を起こさなければならない。以下において、(21)式を転送条件と呼ぶ。これら転送を実現する計算アルゴリズムは、次のようになる。

【0060】

(1) J, Kの一部分を計算する；

(2)  $P(i, j)$  は、転送条件が成立するとき、自らが格納するK(RU)を  $P(i, j + 1)$  へ送信する；

(3)  $P(i, j)$  は、転送条件が成立するとき、 $P(i, j - 1)$  が格納していたK(RU)を受け取る；

(4)  $P(i, j)$  は、自らが格納するD(TS)を  $P(i + 1, j)$  に送信する；

(5)  $P(i, j)$  は、 $P(i - 1, j)$  が格納していたD(TS)を受け取る；

(6)  $P(k)$  は、自らが格納するD(TU)を  $P(k + 1)$  へ送信する；

(7)  $P(k)$  は、 $P(k - 1)$  が格納していたD(TU)を受け取る；

(8) (1) ～ (7) をノードの数だけ繰り返す；

(9) フォック行列Fを計算する。

【0061】

ただし、 $k = (j-1)i_{\max} + i$ である。この方法でも、全ての転送が終了したとき、分配状態は初期状態 ( $S=0$ ) に戻る。

【0062】

〈例3. 四重巡回密度行列法 その1〉

次に、四重巡回密度行列法と呼ぶ形態について説明する。ここでは、密度行列  $D$  とその複製とを合計4個用意し、さらに、2電子積分における  $(rs|tu) \Leftrightarrow (tu|rs)$  の対称性を用いることで、二重巡回密度行列法よりもさらに積分計算を減らし、計算時間の短縮を図っている。ここでの記号は、上述した巡回密度行列法と同様のものを使用する。この方法では、(7)式を次のように分解する。

【0063】

【数17】

$$\begin{aligned}
 F_{rs} &= H_{rs} + J_{rs} - \frac{1}{2}K_{rs} \\
 J_{rs} &= J1_{rs} + J2_{rs} \\
 K_{ru} &= K1_{ru} + K2_{ru} \\
 J1_{rs} &= \sum_{t=1, m \leq n}^N \sum_{u=1, m \leq n}^N D_{tu}(rs|tu)d(m, n) \\
 J2_{tu} &= \sum_{r=1, m \leq n}^N \sum_{s=1, m \leq n}^N D_{rs}(rs|tu)d(m, n) \\
 K1_{ru} &= \sum_{t=1, m \leq n}^N \sum_{s=1, m \leq n}^N D_{ts}(rs|tu)d(m, n) \\
 K2_{ts} &= \sum_{r=1, m \leq n}^N \sum_{u=1, m \leq n}^N D_{ru}(rs|tu)d(m, n)
 \end{aligned} \tag{22}$$

$$m = (s-1)N + r, \quad n = (u-1)N + t, \tag{23}$$

$$d(m, n) = 1 \text{ for } m \neq n, \quad 1/2 \text{ for } m = n \tag{24}$$

【0064】

これは、 $r, s$  によって一意に決まる数  $m$  と、 $t, u$  によって一意に決定される数  $n$  を用いて、クーロン積分  $J$  及び交換積分  $K$  を2つの行列に分けて計算することを表している。2電子積分  $(rs|tu)$  は、 $m, n$  を用いて  $(m|n)$  と表される。2電子積分は  $(rs|tu) = (tu|rs)$  という対称性を持つので、条件  $m \leq n$  より、 $(m|n)$  を行列と考えると、 $J1, K1$  は  $(m|n)$  の下三角、 $J2, K2$  は  $(m|n)$  の上三角部分を計算していることになる。条件  $m \leq n$  をひとまず無視して、(22)式を領域とノードごとの計算に書き直す。

【0065】

## 【数 18】

$$\begin{aligned}
 & \left. \begin{aligned}
 P11 : F(11) &= H(11) + J(11) - 1/2 * K(11), & J(11) &= J1(11) + J2(11), & K(11) &= K1(11) + K2(11) \\
 P21 : F(21) &= H(21) + J(21) - 1/2 * K(21), & J(21) &= J1(21) + J2(21), & K(21) &= K1(21) + K2(21) \\
 P12 : F(12) &= H(12) + J(12) - 1/2 * K(12), & J(12) &= J1(12) + J2(12), & K(12) &= K1(12) + K2(12) \\
 P22 : F(22) &= H(22) + J(22) - 1/2 * K(22), & J(22) &= J1(22) + J2(22), & K(22) &= K1(22) + K2(22)
 \end{aligned} \right\} (25) \\
 \\
 & \begin{aligned}
 P11 : J1(11) &= D(aa)(11|aa)/2, & J1(11) &= D(bb)(11|bb), & J1(11) &= D(ab)(11|ab), & J1(11) &= D(ba)(11|ba) \\
 P21 : J1(21) &= D(ba)(21|ba)/2, & J1(21) &= D(aa)(21|aa), & J1(21) &= D(bb)(21|bb), & J1(21) &= D(ab)(21|ab) \\
 P12 : J1(12) &= D(ab)(12|ab)/2, & J1(12) &= D(ba)(12|ba), & J1(12) &= D(aa)(12|aa), & J1(12) &= D(bb)(12|bb) \\
 P22 : J1(22) &= D(bb)(22|bb)/2, & J1(22) &= D(ab)(22|ab), & J1(22) &= D(ba)(22|ba), & J1(22) &= D(aa)(22|aa) \\
 \\
 P11 : J2(aa) &= D(11)(11|aa)/2, & J2(bb) &= D(11)(11|bb), & J2(ab) &= D(11)(11|ab), & J2(ba) &= D(11)(11|ba) \\
 P21 : J2(ba) &= D(21)(21|ba)/2, & J2(aa) &= D(21)(21|aa), & J2(bb) &= D(21)(21|bb), & J2(ab) &= D(21)(21|ab) \\
 P12 : J2(ab) &= D(12)(12|ab)/2, & J2(ba) &= D(12)(12|ba), & J2(aa) &= D(12)(12|aa), & J2(bb) &= D(12)(12|bb) \\
 P22 : J2(bb) &= D(22)(22|bb)/2, & J2(ab) &= D(22)(22|ab), & J2(ba) &= D(22)(22|ba), & J2(aa) &= D(22)(22|aa) \\
 \\
 P11 : K1(1a) &= D(a1)(11|aa)/2, & K1(1b) &= D(b1)(11|bb), & K1(1b) &= D(a1)(11|ab), & K1(1a) &= D(b1)(11|ba) \\
 P21 : K1(2a) &= D(b1)(21|ba)/2, & K1(2a) &= D(a1)(21|aa), & K1(2b) &= D(b1)(21|bb), & K1(2b) &= D(a1)(21|ab) \\
 P12 : K1(1b) &= D(a2)(12|ab)/2, & K1(1a) &= D(b2)(12|ba), & K1(1a) &= D(a2)(12|aa), & K1(1b) &= D(b2)(12|bb) \\
 P22 : K1(2b) &= D(b2)(22|bb)/2, & K1(2b) &= D(a2)(22|ab), & K1(2a) &= D(b2)(22|ba), & K1(2a) &= D(a2)(22|aa) \\
 \\
 P11 : K2(a1) &= D(1a)(11|aa)/2, & K2(b1) &= D(1b)(11|bb), & K2(a1) &= D(1b)(11|ab), & K2(b1) &= D(1a)(11|ba) \\
 P21 : K2(b1) &= D(2a)(21|ba)/2, & K2(a1) &= D(2a)(21|aa), & K2(b1) &= D(2b)(21|bb), & K2(a1) &= D(2b)(21|ab) \\
 P12 : K2(a2) &= D(1b)(12|ab)/2, & K2(b2) &= D(1a)(12|ba), & K2(a2) &= D(1a)(12|aa), & K2(b2) &= D(1b)(12|bb) \\
 P22 : K2(b2) &= D(2b)(22|bb)/2, & K2(a2) &= D(2b)(22|ab), & K2(b2) &= D(2a)(22|ba), & K2(a2) &= D(2a)(22|aa) \\
 & & & & & & \dots (26)
 \end{aligned}
 \end{aligned}$$

## 【0066】

この計算を実現する各行列の転送順序は、二重巡回密度行列法と同じものを使用し、行列  $J1(RS)$ ,  $D(RS)$  は図4、行列  $D(TU)$ ,  $J2(TU)$  は図5、行列  $K1(RU)$ ,  $D(RU)$  は図6、行列  $D(TS)$ ,  $K2(TS)$  は図7にしたがった転送を行う。すなわち領域  $(RS)$ ,  $(TU)$ ,  $(RU)$ ,  $(TS)$  によって転送方法が異なる。次に、条件を領域ごとに適用できるように、数  $m$ ,  $n$  を次のように書き直す。

## 【0067】

## 【数 19】

$$m = (j-1)i_{\max} + i \quad (i, j = \{1, 2\}), \quad n = (l-1)k_{\max} + k \quad (k, l = \{a, b\}) \quad (27)$$

## 【0068】

ここで、 $i$ ,  $j$  は領域  $R$ ,  $S$  の番号  $\{1, 2\}$  を表し、 $k$ ,  $l$  は領域  $T$ ,  $U$  の番号  $\{a, b\}$  を表す。ただし、 $a=1$ ,  $b=2$  と換算する。この  $m$ ,  $n$  を使用して、行列  $J$  を  $J1$ ,  $J2$  に、行列  $K$  を  $K1$ ,  $K2$  に分けて計算する条件は、いくつか考えられる。

## 【0069】

## 【数 20】

条件(C-1)

$$m \geq n$$

条件(C-2)

$$m \leq n$$

条件(C-3)

$$m = n, \quad m + n = \text{odd for } m < n, \quad m + n = \text{even for } m > n$$

条件(C-4)

$$m = n, \quad m + n = \text{odd for } m > n, \quad m + n = \text{even for } m < n$$

## 【0070】

例えば、条件 (c-1), (c-3) を適用した場合は、 $J1$ ,  $J2$ ,  $K1$ ,  $K2$  の計算は次のようになる。

## 【0071】

条件 (c-1) を適用した場合:

## 【0072】

## 【数21】

$$\begin{array}{llll}
P11 : J1(11) = D(aa)(11|aa)/2, & J1(11) = D(bb)(11|bb), & J1(11) = D(ab)(11|ab), & J1(11) = D(ba)(11|ba) \\
P21 : J1(21) = D(ba)(21|ba)/2, & & J1(21) = D(bb)(21|bb), & J1(21) = D(ab)(21|ab) \\
P12 : J1(12) = D(ab)(12|ab)/2, & & & J1(12) = D(bb)(12|bb) \\
P22 : J1(22) = D(bb)(22|bb)/2, & & & \\
\\
P11 : J2(aa) = D(11)(11|aa)/2, & J2(bb) = D(11)(11|bb), & J2(ab) = D(11)(11|ab), & J2(ba) = D(11)(11|ba) \\
P21 : J2(ba) = D(21)(21|ba)/2, & & J2(bb) = D(21)(21|bb), & J2(ab) = D(21)(21|ab) \\
P12 : J2(ab) = D(12)(12|ab)/2, & & & J2(bb) = D(12)(12|bb) \\
P22 : J2(bb) = D(22)(22|bb)/2, & & & \\
\\
P11 : K1(1a) = D(a1)(11|aa)/2, & K1(1b) = D(b1)(11|bb), & K1(1b) = D(a1)(11|ab), & K1(1a) = D(b1)(11|ba) \\
P21 : K1(2a) = D(b1)(21|ba)/2, & & K1(2b) = D(b1)(21|bb), & K1(2b) = D(a1)(21|ab) \\
P12 : K1(1b) = D(a2)(12|ab)/2, & & & K1(1b) = D(b2)(12|bb) \\
P22 : K1(2b) = D(b2)(22|bb)/2, & & & \\
\\
P11 : K2(a1) = D(1a)(11|aa)/2, & K2(b1) = D(1b)(11|bb), & K2(a1) = D(1b)(11|ab), & K2(b1) = D(1a)(11|ba) \\
P21 : K2(b1) = D(2a)(21|ba)/2, & & K2(b1) = D(2b)(21|bb), & K2(a1) = D(2b)(21|ab) \\
P12 : K2(a2) = D(1b)(12|ab)/2, & & & K2(b2) = D(1b)(12|bb) \\
P22 : K2(b2) = D(2b)(22|bb)/2, & & & 
\end{array}$$

... (28)

## 【0073】

条件 (c-3) を適用した場合:

## 【0074】

## 【数22】

$$\begin{array}{llll}
P11 : J1(11) = D(aa)(11|aa)/2, & J1(11) = D(bb)(11|bb), & & J1(11) = D(ba)(11|ba) \\
P21 : J1(21) = D(ba)(21|ba)/2, & & & J1(21) = D(ab)(21|ab) \\
P12 : J1(12) = D(ab)(12|ab)/2, & & J1(12) = D(aa)(12|aa), & J1(12) = D(bb)(12|bb) \\
P22 : J1(22) = D(bb)(22|bb)/2, & & J1(22) = D(ba)(22|ba), & \\
\\
P11 : J2(aa) = D(11)(11|aa)/2, & J2(bb) = D(11)(11|bb), & & J2(ba) = D(11)(11|ba) \\
P21 : J2(ba) = D(21)(21|ba)/2, & & & J2(ab) = D(21)(21|ab) \\
P12 : J2(ab) = D(12)(12|ab)/2, & & J2(aa) = D(12)(12|aa), & J2(bb) = D(12)(12|bb) \\
P22 : J2(bb) = D(22)(22|bb)/2, & & J2(ba) = D(22)(22|ba), & \\
\\
P11 : K1(1a) = D(a1)(11|aa)/2, & K1(1b) = D(b1)(11|bb), & & K1(1a) = D(b1)(11|ba) \\
P21 : K1(2a) = D(b1)(21|ba)/2, & & & K1(2b) = D(a1)(21|ab) \\
P12 : K1(1b) = D(a2)(12|ab)/2, & & K1(1a) = D(a2)(12|aa), & K1(1b) = D(b2)(12|bb) \\
P22 : K1(2b) = D(b2)(22|bb)/2, & & K1(2a) = D(b2)(22|ba), & \\
\\
P11 : K2(a1) = D(1a)(11|aa)/2, & K2(b1) = D(1b)(11|bb), & & K2(b1) = D(1a)(11|ba) \\
P21 : K2(b1) = D(2a)(21|ba)/2, & & & K2(a1) = D(2b)(21|ab) \\
P12 : K2(a2) = D(1b)(12|ab)/2, & & K2(a2) = D(1a)(12|aa), & K2(b2) = D(1b)(12|bb) \\
P22 : K2(b2) = D(2b)(22|bb)/2, & & K2(b2) = D(2a)(22|ba), & 
\end{array}$$

... (29)

## 【0075】

条件 (c-3), (c-4) の方が、各ノードの計算量が比較的平均化される。結局、計算アルゴリズムは以下のようになる。

## 【0076】

(1) (c-1) ~ (c-4) の何れかの条件を満たすとき、J1, J2, K1, K2 の一部分を計算する;

(2) P(i, j) は、転送条件が成立するとき、自らが格納する K1(RU), D(RU) を P(i, j+1) へ送信する;

(3) P(i, j) は、転送条件が成立するとき、P(i, j-1) が格納していた K1(RU), D(RU) を受け取る;

(4) P(i, j) は、自らが格納する K2(TS), D(TS) を P(i+1, j) に送信する;

(5)  $P(i, j)$ は、 $P(i-1, j)$ が格納していた $K2(TS)$ ,  $D(TS)$ を受け取る

;

(6)  $P(k)$ は、自らが格納する $J2(TU)$ ,  $D(TU)$ を $P(k+1)$ へ送信する;

(7)  $P(k)$ は、 $P(k-1)$ が格納していた $J2(TU)$ ,  $D(TU)$ を受け取る;

(8) (1) ~ (7) をノードの数だけ繰り返す;

(9)  $J, K$ を計算する;

(10)  $F$ を計算する。

【0077】

ただし、ノード番号は次のように読みかえている。

【0078】

【数23】

$$\left. \begin{aligned} P(1) &= P(1, 1) = P11, \\ P(2) &= P(2, 1) = P21, \\ P(3) &= P(1, 2) = P12, \\ P(4) &= P(2, 2) = P22 \end{aligned} \right\} (30)$$

【0079】

〈例4. 四重巡回密度行列法 その2〉

次に、四重巡回密度行列法と呼ぶ形態の別の例について説明する。

【0080】

上述した四重巡回密度行列法では、ノード数が奇数個の場合に限り、条件 $(c-3)$ ,  $(c-4)$ 下の計算を別の方法で行なうことができる。ノード数が4, 9で条件 $(c-3)$ を満たす場合について、領域ごとの2電子積分 $(rs|tu) = (m|n)$ を、図9、図10のように図示する。白四角の部分は、計算する2電子積分 $(m|n)$ を表し、黒四角の部分は、条件 $(c-3)$ によって計算しない $(m|n)$ を表す。また、各ノード $P_{ij}$  ( $i, j = \{1, 2\}$  または  $\{1, 2, 3\}$ ) は、横一列を計算する。計算の順序は、対角成分 $(m|m)$ から計算が始まり、転送により $(m|m-1)$ に移動する。図9、図10の四角形内部の数字がこの計算順序を表している。ノード数9の場合は、2, 4, 6, 8に対応する四角形部分は全ノードで黒四角形であり、2電子積分を計算しないことを示している。ノード数が奇数個の場合は、転送を繰り返すと、黒四角形部分と白四角形部分とを交互に辿ることになる。ノード数4の場合は、どの番号の四角形部分においても必ず一つは白四角形があり、ノード数が偶数個の場合にも一般化できる。したがって、ノード数が奇数個の場合には、1, 3, 5, 7, 9の四角形部分に対応して計算しさえすればよく、転送を一回分跳ばして行なうことができる。ただし、最後の一回だけは一回分のみ転送する。この場合の計算アルゴリズムは次のようになる。

【0081】

(1)  $J1, J2, K1, K2$ の一部分を計算する;

(2)  $P(i, j)$ は、転送条件が成立するとき、自らが格納する $K1(RU)$ ,  $D(RU)$ を $P(i, j+1)$ へ送信する;

(3)  $P(i, j)$ は、転送条件が成立するとき、 $P(i, j-1)$ が格納していた $K1(RU)$ ,  $D(RU)$ を受け取る;

(4)  $P(i, j)$ は、自らが格納する $K2(TS)$ ,  $D(TS)$ を $P(i+2, j)$ に送信する;

(5)  $P(i, j)$ は、 $P(i-2, j)$ が格納していた $K2(TS)$ ,  $D(TS)$ を受け取る;

;

(6)  $P(k)$ は、自らが格納する $J2(TU)$ ,  $D(TU)$ を $P(k+2)$ へ送信する;

(7)  $P(k)$ は、 $P(k-2)$ が格納していた $J2(TU)$ ,  $D(TU)$ を受け取る;

(8) (1) ~ (7) を (ノード数/2) に相当する回数繰り返す;

(9)  $J1, J2, K1, K2$ の一部分を計算する;



(10)  $P(i, j)$ は、転送条件が成立するとき、自らが格納する  $K1(RU)$ ,  $D(RU)$ を  $P(i, j+1)$ へ送信する;

(11)  $P(i, j)$ は、転送条件が成立するとき、 $P(i, j-1)$ が格納していた  $K1(RU)$ ,  $D(RU)$ を受け取る;

(12)  $P(i, j)$ は、自らが格納する  $K2(TS)$ ,  $D(TS)$ を  $P(i+1, j)$ に送信する;

(13)  $P(i, j)$ は、 $P(i-1, j)$ が格納していた  $K2(TS)$ ,  $D(TS)$ を受け取る;

(14)  $P(k)$ は、自らが格納する  $J2(TU)$ ,  $D(TU)$ を  $P(k+1)$ へ送信する;

(15)  $P(k)$ は、 $P(k-1)$ が格納していた  $J2(TU)$ ,  $D(TU)$ を受け取る;

(16)  $J, K$ を計算する;

(17)  $F$ を計算する。

#### 【0082】

条件 (c-4) を満たす場合は、転送順序を逆にするか、最後の一回分のみの転送を最初に行なえばよい。すなわち、上記のアルゴリズムを (9), ..., (15), (1), ..., (8), (16), (17) と行なえばよい。

#### 【0083】

##### 《例5. 一般化》

上述した各種の巡回密度行列法は、ノード数  $N$ 、分割数  $M (> N)$  の場合でも計算することができるが、各行列の分割方法は揃えておく必要がある。すなわち、領域  $R$  と  $T$  の個数が一致し、領域  $S$  と  $U$  の個数が一致していなければならない。「四重巡回密度行列法その2」では、一般化すると次のようなアルゴリズムになる。

#### 【0084】

(1) 条件 (c-3) を満たすとき、 $J1, J2, K1, K2$  の一部分を計算する;

(2)  $P(i, j)$ は、転送条件が成立するとき、自らが格納する  $K1(RU)$ ,  $D(RU)$ を  $P(i, j+1)$ へ送信する;

(3)  $P(i, j)$ は、転送条件が成立するとき、 $P(i, j-1)$ が格納していた  $K1(RU)$ ,  $D(RU)$ を受け取る;

(4)  $P(i, j)$ は、自らが格納する  $K2(TS)$ ,  $D(TS)$ を  $P(i+2, j)$ に送信する;

(5)  $P(i, j)$ は、 $P(i-2, j)$ が格納していた  $K2(TS)$ ,  $D(TS)$ を受け取る;

(6)  $P(k)$ は、自らが格納する  $J2(TU)$ ,  $D(TU)$ を  $P(k+2)$ へ送信する;

(7)  $P(k)$ は、 $P(k-2)$ が格納していた  $J2(TU)$ ,  $D(TU)$ を受け取る;

(8)  $J1, J2, K1, K2$  の一部分を計算する;

(9)  $P(i, j)$ は、転送条件が成立するとき、自らが格納する  $K1(RU)$ ,  $D(RU)$ を  $P(i, j+1)$ へ送信する;

(10)  $P(i, j)$ は、転送条件が成立するとき、 $P(i, j-1)$ が格納していた  $K1(RU)$ ,  $D(RU)$ を受け取る;

(11)  $P(i, j)$ は、自らが格納する  $K2(TS)$ ,  $D(TS)$ を  $P(i+2, j)$ に送信する;

(12)  $P(i, j)$ は、 $P(i-2, j)$ が格納していた  $K2(TS)$ ,  $D(TS)$ を受け取る;

(13)  $P(k)$ は、自らが格納する  $J2(TU)$ ,  $D(TU)$ を  $P(k+2)$ へ送信する;

(14)  $P(k)$ は、 $P(k-2)$ が格納していた  $J2(TU)$ ,  $D(TU)$ を受け取る;

(15) (8) ~ (14) を  $\lfloor (\text{ノード数}/2) - 1 \rfloor$  に相当する回数繰り返す;

(16)  $J1, J2, K1, K2$  の一部分を計算する;

(17)  $P(i, j)$ は、転送条件が成立するとき、自らが格納する  $K1(RU)$ ,  $D(RU)$ を  $P(i, j+1)$ へ送信する;

(18)  $P(i, j)$ は、転送条件が成立するとき、 $P(i, j-1)$ が格納する  $K1(RU)$ ,  $D(RU)$ を受け取る;

(19)  $P(i, j)$ は、自らが格納する  $K2(TS)$ ,  $D(TS)$ を  $P(i+1, j)$ に送信する;

(20)  $P(i, j)$ は、 $P(i-1, j)$ が格納する  $K2(TS)$ ,  $D(TS)$ を受け取る;

(21)  $P(k)$ は、自らが格納する  $J2(TU)$ ,  $D(TU)$ を  $P(k+1)$ へ送信する;

(22)  $P(k)$ は、 $P(k-1)$ が格納していた  $J2(TU)$ ,  $D(TU)$ を受け取る;

(23)  $J, K$ を計算する;

(24)  $F$ を計算する。

#### 【0085】

条件 (c-4) を満たす場合は、転送を逆に巡回させるか、最初の転送を一回分にすればよい。

#### 【0086】

以上、本発明の好ましい実施形態を説明したが、本発明は、計算機クラスタでの実現を前提とするものである。したがって、計算機クラスタを構成する各計算機は、上述した各ノードでの処理を実行するものでなくてはならない。各計算機は、ノードとしての処理を実現するための計算機プログラムを読み込み、そのプログラムを実行することによって、上述した各処理を実行するようになる。そのようなプログラムは、磁気テープやCD-ROMなどの記録媒体によって、あるいはネットワークを介して、計算機に読み込まれる。

#### 【図面の簡単な説明】

#### 【0087】

【図1】分散メモリ型並列計算機すなわちPCクラスタとして構成された本発明の実施の一形態の並列計算装置の構成を示すブロック図である。

【図2】各計算機の論理的な構成を示すブロック図である。

【図3】本発明の並列計算方法に基づく、密度行列を分割した場合におけるフォック行列生成アルゴリズムを示すフローチャートである。

【図4】ノード数4の場合における領域  $(RS)$  (行列  $J(RS)$ ) に対する転送順序を表した図である。

【図5】ノード数4の場合における領域  $(TU)$  (行列  $D(TU)$ ) に対する転送順序を表した図である。

【図6】ノード数4の場合における領域  $(RU)$  (行列  $K(RU)$ ) に対する転送順序を表した図である。

【図7】ノード数4の場合における領域  $(TS)$  (行列  $D(TS)$ ) に対する転送順序を表した図である。

【図8】図6に示した転送順序を分かりやすく書き直した図である。

【図9】ノード数4のとき、2電子積分  $(RS|TU)$  を  $(m|n)$  と書き直し、行列であるとみなして、2電子積分の計算実行の有無を説明する図である。

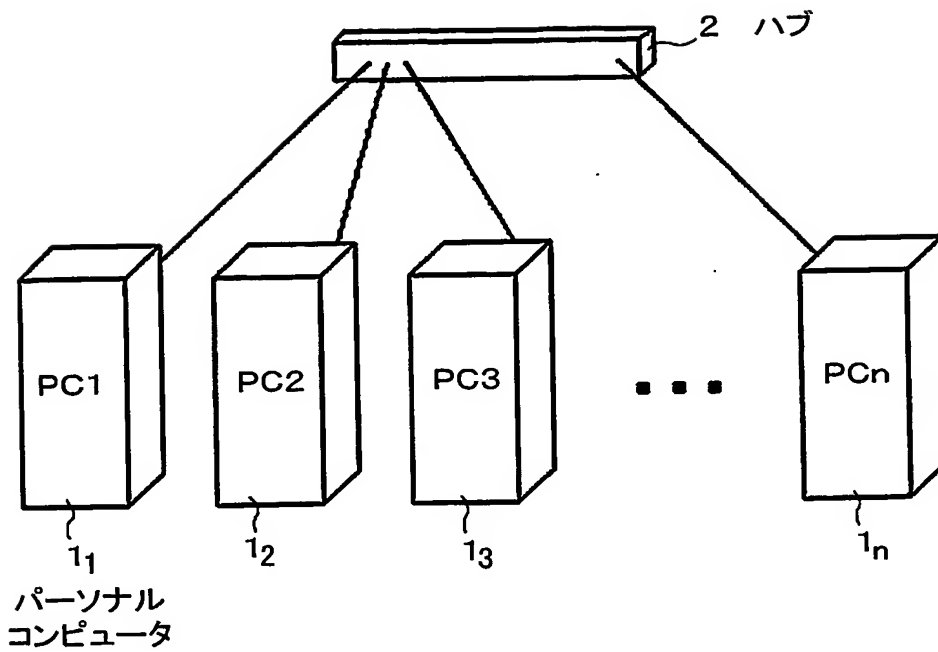
【図10】ノード数9のとき、2電子積分  $(RS|TU)$  を  $(m|n)$  と書き直し、行列であるとみなして、2電子積分の計算実行の有無を説明する図である。

#### 【符号の説明】

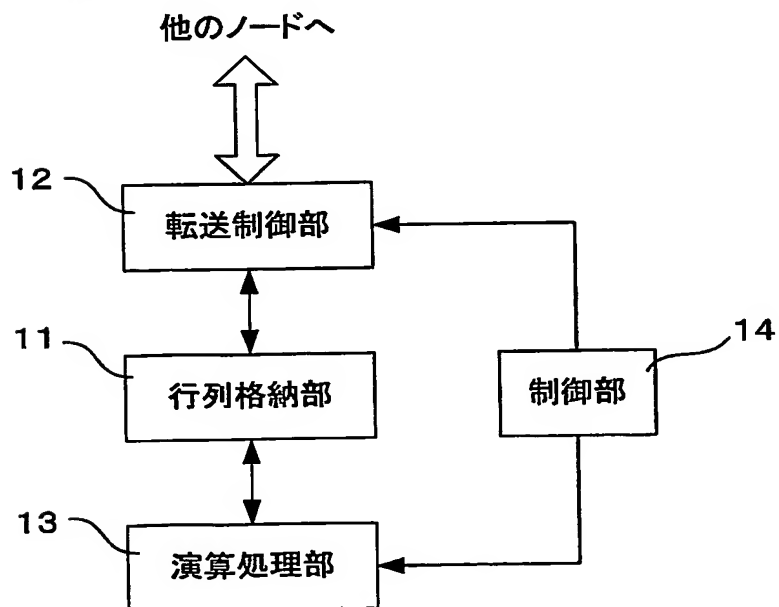
#### 【0088】

- 1<sub>1</sub> ~ 1<sub>n</sub>    計算機
- 2        ハブ
- 11       行列格納部
- 12       転送制御部
- 13       演算処理部
- 14       制御部
- 101 ~ 106    ステップ

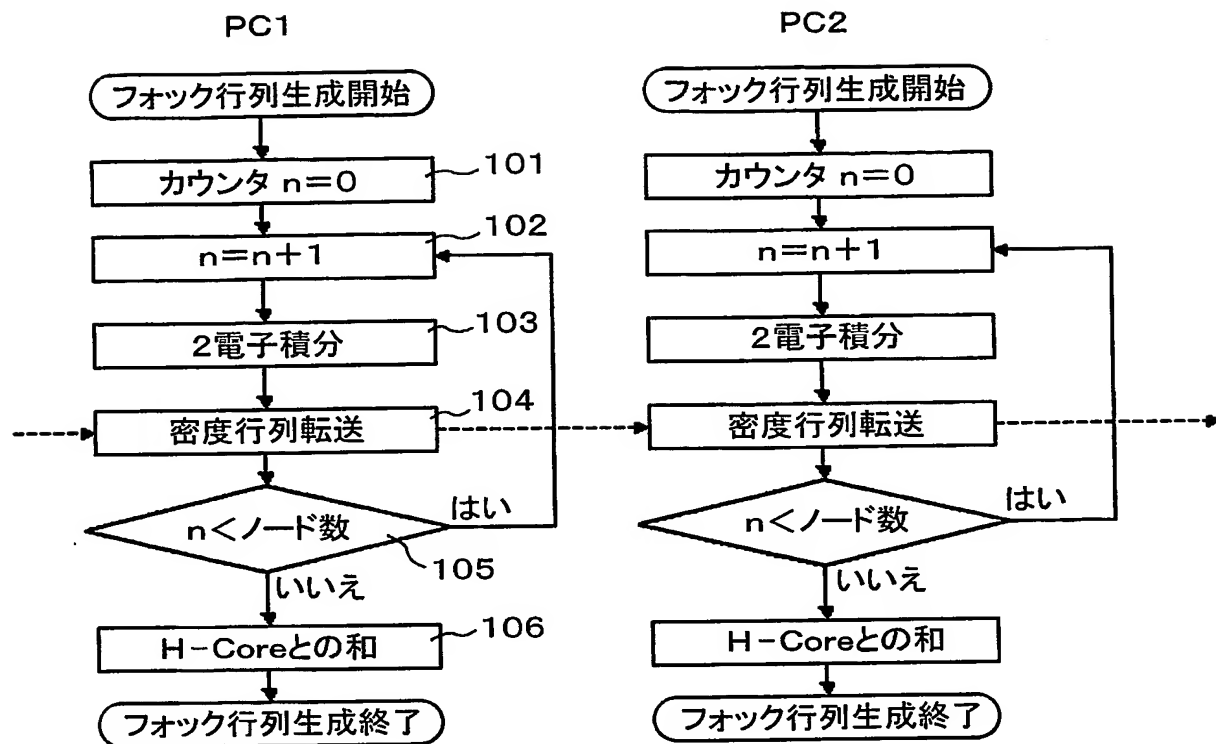
【書類名】図面  
【図 1】



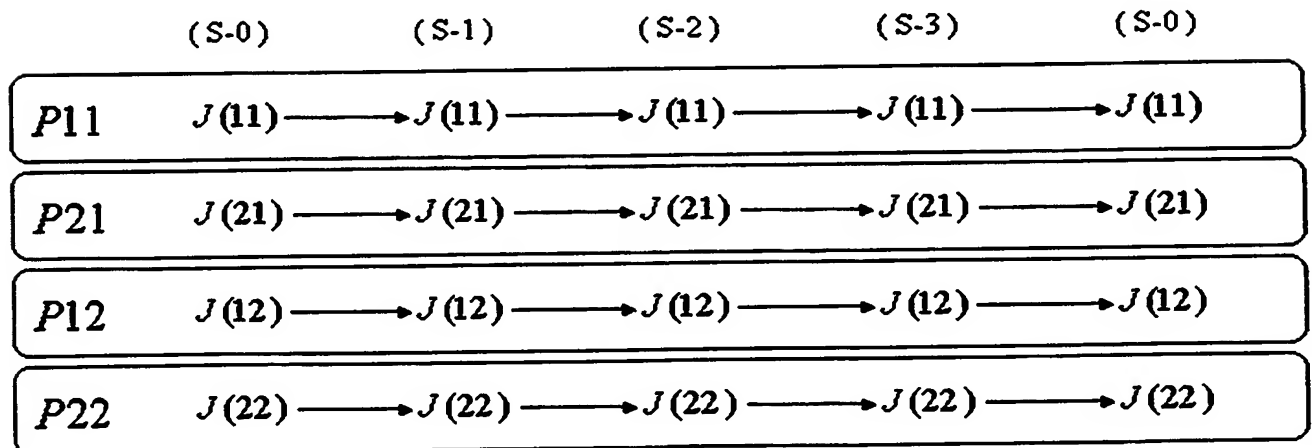
【図 2】



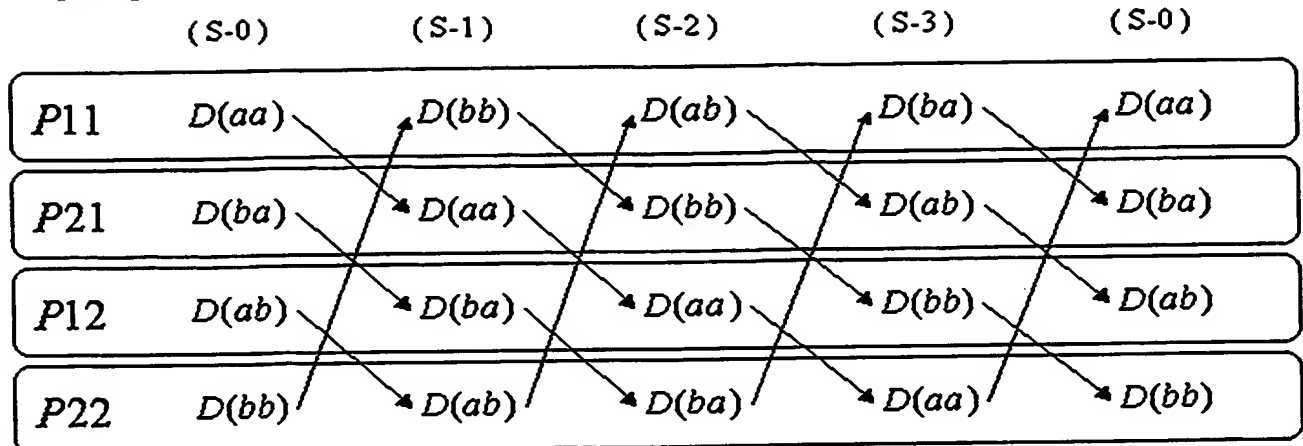
【図 3】



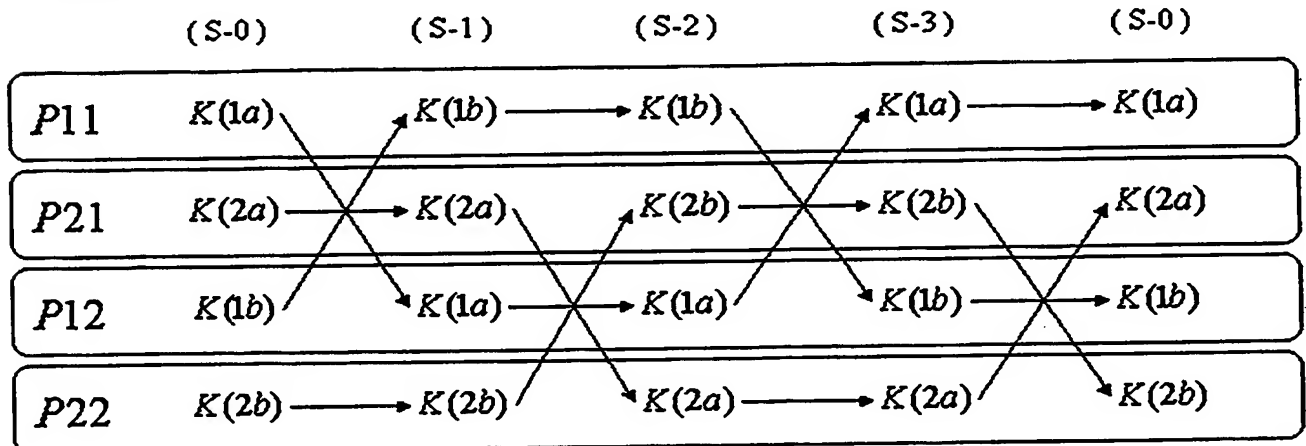
【図 4】



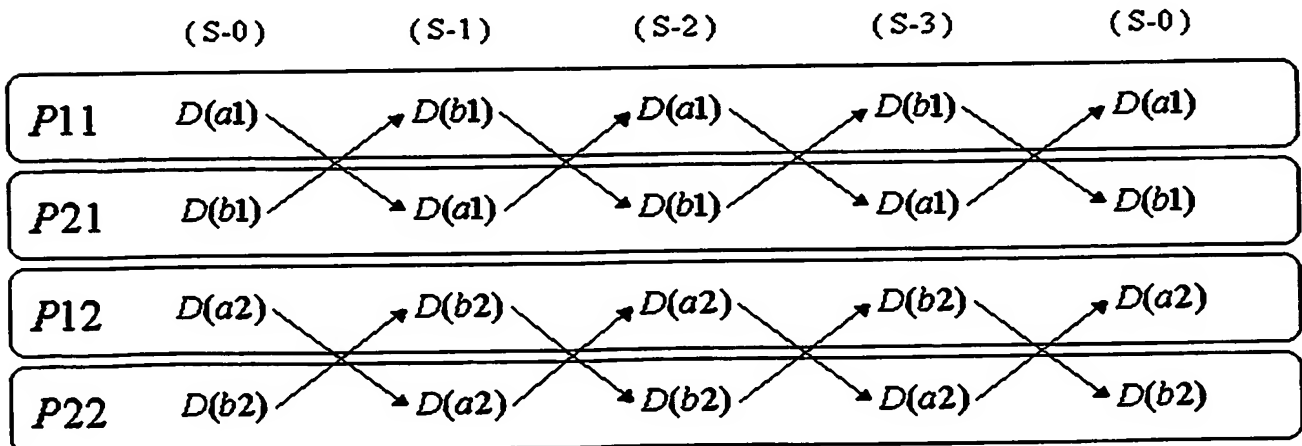
【図 5】



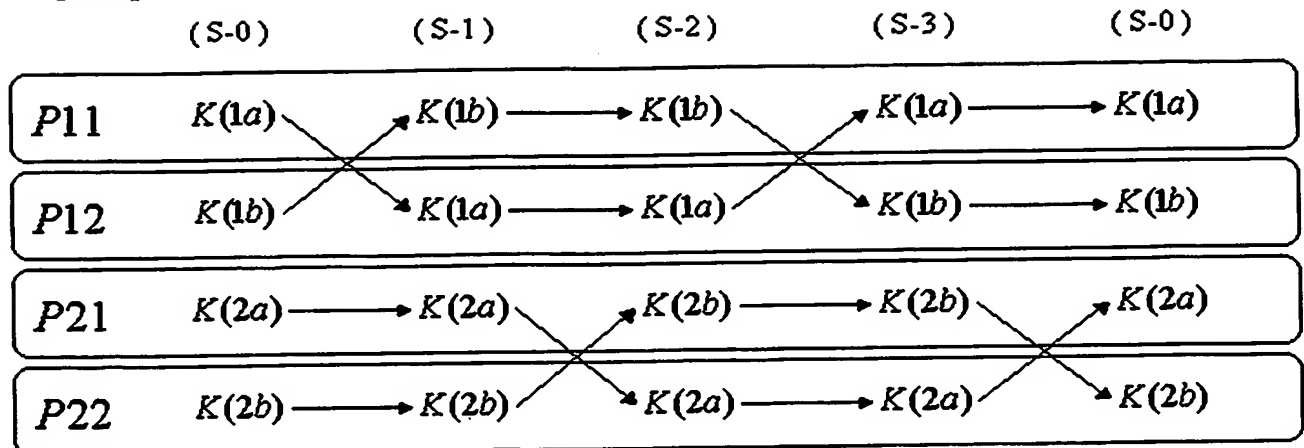
【図 6】



【図 7】



【図 8】



【図 9】

| $n \backslash m$ | 1 | 2 | 3 | 4 |
|------------------|---|---|---|---|
| 1                | 1 | 4 | 3 | 2 |
| 2                | 2 | 1 | 4 | 3 |
| 3                | 3 | 2 | 1 | 4 |
| 4                | 4 | 3 | 2 | 1 |

【図 10】

| $n \backslash m$ | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 |
|------------------|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 1                | 1 | 9 | 8 | 7 | 6 | 5 | 4 | 3 | 2 |
| 2                | 2 | 1 | 9 | 8 | 7 | 6 | 5 | 4 | 3 |
| 3                | 3 | 2 | 1 | 9 | 8 | 7 | 6 | 5 | 4 |
| 4                | 4 | 3 | 2 | 1 | 9 | 8 | 7 | 6 | 5 |
| 5                | 5 | 4 | 3 | 2 | 1 | 9 | 8 | 7 | 6 |
| 6                | 6 | 5 | 4 | 3 | 2 | 1 | 9 | 8 | 7 |
| 7                | 7 | 6 | 5 | 4 | 3 | 2 | 1 | 9 | 8 |
| 8                | 8 | 7 | 6 | 5 | 4 | 3 | 2 | 1 | 9 |
| 9                | 9 | 8 | 7 | 6 | 5 | 4 | 3 | 2 | 1 |

【書類名】 要約書

【要約】

【課題】 分散メモリ型並列計算機による分子軌道法計算（特にハートレー・フォック計算）の大規模並列計算を可能にする。

【解決手段】 計算機クラスタを使用して必要な全ての行列を分割して保存した場合のフォック行列生成過程において、密度行列を複数の部分密度行列に分割してこれらの部分密度行列を計算機クラスタの各計算機上に分散して格納し、部分密度行列を計算機間で順番に転送させながら（ステップ104）、各計算機において部分密度行列に関する2電子積分などの演算処理を実行する（ステップ103）。

【選択図】 図3



特願 2003-330290

出願人履歴情報

識別番号

[000004237]

1. 変更年月日

1990年 8月29日

[変更理由]

新規登録

住 所

東京都港区芝五丁目7番1号

氏 名

日本電気株式会社

特願 2 0 0 3 - 3 3 0 2 9 0

出 願 人 履 歴 情 報

識別番号

[ 0 0 0 2 3 2 0 9 2 ]

1. 変更年月日

2 0 0 2 年 1 2 月 2 5 日

[変更理由]

名称変更

住 所

東京都江東区新木場一丁目 1 8 番 6 号

氏 名

N E C ソフト株式会社